



TITLE:

# 有機分子性結晶の気体吸着特性の解析

AUTHOR(S):

津江, 広人

---

CITATION:

津江, 広人. 有機分子性結晶の気体吸着特性の解析. 京都大学化学研究所  
スーパーコンピュータシステム研究成果報告書 2019, 2018: 62-62

ISSUE DATE:

2019-03

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/241189>

RIGHT:

有機分子性結晶の気体吸着特性の解析

Analysis of the gas sorption behavior of organic molecular crystals

京都大学 大学院人間・環境学研究科 相関環境学専攻 分子・生命環境論講座 津江 広人

研究成果概要

多孔性材料は、気体分子の分離・精製・貯蔵などの用途に幅広く適用可能なため、古くから研究され、現在でもなお新規材料の開拓が活発に進められている。これまでに当研究室では、有機分子性結晶が発現する気体吸着特性の解明を目的として、安価かつ生体適合性をもつジペプチドに着目し、その結晶構造と気体吸着挙動の関係について報告してきた。その研究過程において、N 末端を保護した BocGly-L-Phe（以下、**1** と略記。図1）の単結晶が、二酸化炭素を高選択的に吸着することが明らかになっている。

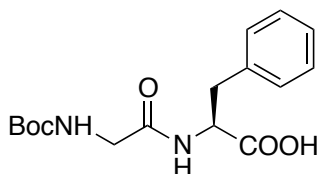


図1 **1** の分子構造

そこで本研究では、**1** の結晶が示す二酸化炭素に対する親和性を解明することを目的として、**1** の単結晶が二酸化炭素を吸着した状態の結晶構造解析を行った(図2)。次いで、計算化学統合パッケージ Materials Studio の DMol<sup>3</sup> を用いて、二酸化炭素の吸着状態の原子座標から結晶構造の最適化を行った。今後、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムにインストールされている量子化学計算プログラム Gaussian を用いて、結晶中での **1** と二酸化炭素との分子間相互作用を解析する予定である。

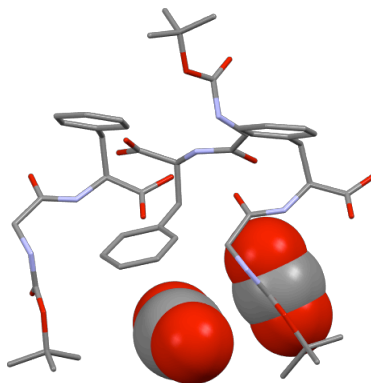


図2 **1** の CO<sub>2</sub> 吸着状態